

ФУНДАМЕНТАЛЬНОЕ ОТРАЖЕНИЕ ТЕЛЛУРИДОВ ГРУППЫ $A^{IV}B^{VI}$ ПРИ $20^{\circ}K$ В ОБЛАСТИ $1,75-5,64$ эв

И. Н. БОРИСОВ, П. С. КИРЕЕВ, В. В. МИХАЙЛИН

Статья посвящена отражению монокристаллов $ZnTe$, $CdTe$ и $HgTe$ в области $1,75-5,64$ эв при комнатной температуре и $20^{\circ}K$. Данные по положению пиков отражения при $20^{\circ}K$ могут быть использованы в точных расчетах зонной структуры исследуемых материалов.

В полупроводниках, у которых температура Дебая — Q_D меньше или равна комнатной температуре, можно заметно улучшить спектры отражения путем измерений при низких температурах [1, 2]. Было отмечено [3], что подобные межзонные переходы в кристаллах одинаковой структуры, но имеющих разный состав, имеют близкие температурные коэффициенты, что позволяет с большей степенью надежности проводить интерпретацию спектров отражения. Исследования спектров отражения в области фундаментального поглощения при температуре жидкого гелия [2], позволяют выявить новые особенности в структуре спектра, которые могли не проявиться при комнатной температуре и температуре жидкого азота [1]. Однако в литературе известна только одна работа [2], посвященная измерениям спектра отражения $HgTe$ при $4,2^{\circ}K$ в области $4-12$ эв. Важный вывод, который может быть сделан из этих измерений, заключается в уточнении энергетического положения пиков, а следовательно, и энергий межзонных переходов, что играет большую роль в расчетах зонной структуры.

Нами были изучены спектры отражения $ZnTe$, $CdTe$ и $HgTe$ в области $1,75-5,64$ эв при комнатной температуре и $20^{\circ}K$. Измерения проводились на спектрофотометре СФ-4А с модифицированной [4] приставкой ПЗ0-1 при угле падения 12° . В приставке закрепляется гелиевый криостат типа А-П с кварцевыми окнами. Образцы крепились к держателю лаком ДИО SAN—Rapid. Температура образцов измерялась компенсационным методом с помощью угольного радиосопротивления фирмы Allen—Breadly, один из выводов которого подпаивался оловом к торцу образца. Для предотвращения образования масляных пленок на поверхности образцов система откачивалась до высокого вакуума — $7 \cdot 10^{-5}$ мм рт. ст. и были применены две азотные ловушки.

Рентгеновские измерения показали, что образцы всех трех теллуридов были монокристаллами с высокой степенью совершенства. Образцы $CdTe$ и $HgTe$ травились в стандартных для каждого соединения травителях, а образцы $ZnTe$ получены скалыванием.

Относительная ошибка в измерении коэффициента отражения не превышала 2%. Реальность пиков в области слабой структуры под-

тверждалась повторными измерениями. Поскольку травленная поверхность не всегда зеркальна и трудно получить достаточно плоский скол большой поверхности, то, вследствие рассеяния, абсолютные значения коэффициента отражения, показанные на экспериментальных кривых, должны быть рассмотрены как приблизительные и возможна ошибка в $\pm 5\%$. Ошибка в определении положения пиков отражения — $(\pm 0,01 + 0,02 \text{ эв})$.

На рис. 1, 2 и 3 представлены результаты измерений спектров отражения ZnTe и CdTe и HgTe в области 1,75—5,64 эв при комнатной

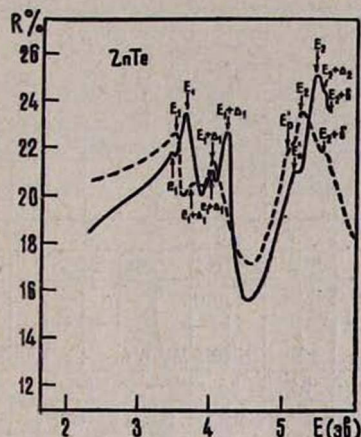


Рис. 1. Спектр отражения ZnTe в области 1,75—5,64 эв. Пунктирной линией представлены данные при 295°K, сплошной—при 20°K.

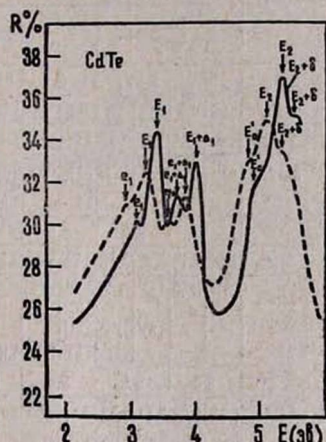


Рис. 2. Спектр отражения CdTe в области 1,74—5,64 эв. Пунктирной линией представлены данные при 295°K, сплошной—при 20°K.

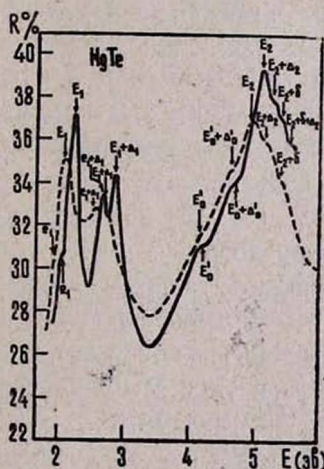


Рис. 3. Спектр отражения HgTe в области 1,75—5,64 эв. Пунктирной линией представлены данные при 295°K, сплошной—при 20°K.

температуре и 20°K. Данные комнатно-температурных измерений (пунктирная линия) всех трех теллуридов находятся в разумном согласии с данными по отражению [1, 2], электроотражению [5] и пропусканию

[6, 7]. Полученная нами впервые структура в спектрах отражения при 2,91 эв в CdTe и 5,54 эв в ZnTe подробно проинтерпретирована в [4]. В HgTe замечены слабые структуры при 1,96, 3,98 и 4,64 эв, обозначенные соответственно ϵ_1 , C и $E_0 + \Delta_0$. Структуры типа ϵ_1 и $\epsilon_1 + \Delta_1$ во всех теллуридах проявляются гораздо более отчетливо, чем в [1], что говорит о хорошем качестве образцов и лучшей, чем в [1], обработке поверхности. В таблице даны энергетические положения пиков, их температурные коэффициенты и предлагаемая интерпретация.

ТАБЛИЦА 1

ПРЕДЛАГАЕМАЯ ИНТЕРПРЕТАЦИЯ	$L_{5v}, L_{5v} \rightarrow L_{1c}$				$A_{4v}, A_{5v} \rightarrow A_{5v}$				$\Delta_{3v} \rightarrow \Delta_{3c}$				$X_{5v} - X_{1c}$							
	L_{5v}		L_{1c}		A_{5v}		A_{4v}		Δ_{3v}		Δ_{3c}		$X_{5v} \rightarrow X_{1c}$		$X_{5v} \rightarrow X_{3c}$		$X_{1c} \rightarrow X_{3c}$		$X_{3c} \rightarrow X_{5v}$	
	ϵ_1	$\epsilon_1 + \Delta_1$	E_1	$E_1 + \Delta_1$	E_0	$E_0 + \Delta_0$	E_2	$E_2 + \Delta_2$	E_2	$E_2 + \Delta_2$	$E_2 + \delta$	$E_2 + \delta + \Delta_2$	E_2	$E_2 + \Delta_2$	$E_2 + \delta$	$E_2 + \delta + \Delta_2$	E_2	$E_2 + \Delta_2$	$E_2 + \delta$	$E_2 + \delta + \Delta_2$
ТЕМПЕРАТУРА (°K)	295	20	295	20	295	20	295	20	295	20	295	20	295	20	295	20	295	20	295	20
ИССЛЕДУЕМЫЕ МАТЕРИАЛЫ	ZnTe	НАШИ ДАННЫЕ	—	3.44	3.77	3.39	3.49	3.64	4.00	4.18	—	—	5.11	5.21	5.26	5.44	—	5.54	5.54	5.59
		ЛИТЕРАТУРНЫЕ ДАННЫЕ	3.41 ¹	77°K	3.58 ¹	77°K	3.58 ¹	77°K	4.14 ¹	77°K	—	—	4.82 ¹	77°K	5.41 ¹	77°K	—	—	—	—
		ТЕМПЕРАТ. КОЭФФ. 10^{-4} 30°K	—	8.0	5.5	6.4	—	—	3.6	6.6	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—
	CdTe	НАШИ ДАННЫЕ	2.91	3.10	3.56	3.71	3.24	3.39	3.84	4.00	—	—	4.90	4.96	5.09	5.35	5.44	5.30	5.43	—
		ЛИТЕРАТУРНЫЕ ДАННЫЕ	3.49 ¹	77°K	3.63 ¹	77°K	3.32 ¹	77°K	3.32 ¹	77°K	—	—	5.16 ¹	77°K	5.40 ¹	77°K	—	—	—	—
		ТЕМПЕРАТ. КОЭФФ. 10^{-4} 30°K	6.8	5.4	5.6	6.2	—	—	2.2	8.4	—	—	5.25 ¹	77°K	5.44 ¹	77°K	—	—	6.02 ¹	77°K
	HgTe	НАШИ ДАННЫЕ	1.96	2.06	2.57	2.70	2.11	2.25	2.72	2.87	4.19	4.22	4.64	4.70	4.96	5.13	5.19	5.23	5.37	5.54
		ЛИТЕРАТУРНЫЕ ДАННЫЕ	2.00 ¹	77°K	2.53 ¹	77°K	2.03 ¹	77°K	2.71 ¹	77°K	4.03 ¹	77°K	—	—	4.84 ¹	77°K	5.15 ¹	77°K	5.27 ¹	77°K
		ТЕМПЕРАТ. КОЭФФ. 10^{-4} 30°K	3.1	4.7	5.1	5.5	1.5	2.2	6.0	1.4	—	—	4.97 ¹	77°K	5.11 ¹	77°K	5.41 ¹	77°K	5.61 ¹	77°K

При 20°K нами обнаружены новые структуры при 5,44 эв ($E_2 + \Delta_2$) в CdTe, 5,54 эв ($E_2 + \Delta_2$) в ZnTe, при 5,37 эв ($E_2 + \delta$) и 5,54 эв ($E_2 + \delta + \Delta_2$) в HgTe. Структура $E_2 + \delta$ и $E_2 + \delta + \Delta_2$ в HgTe подобна полученным при 4,2°K слабым порогам $B - B + \Delta_2$ в работе [2] на том же материале, хотя наблюдается некоторый сдвиг по энергии в сторону больших значений и небольшая разница в величине Δ_2 . Структуры $E_2 - E_2 + \Delta_2$ и $E_2 + \delta - E_2 + \delta + \Delta_2$ во всех теллуридах интерпретируются как вызванные переходами $X_{5v} - X_{1c}$ и $X_{5v} - X_{3c}$, дублетность которых обусловлена спин-орбитальным расщеплением точки X_{5v} . Эта интерпретация проводится на основе расчета зонной структуры CdTe методом псевдопотенциала [8], в которых получены критические точки типа M_0 при 4,95—5,25 эв и типа M_0 при 5,45—5,75 эв, вызванные переходами в точке X между зонами 3—5, 4—5 и 3—6 соответственно. Некоторая разница в энергии этих дублетов связана с тем, что в CdTe пики в спектрах ϵ_2 и R отличаются не на ~0,1 эв, как во всех других материалах семейства цинковой обманки, а на большую (0,4—0,5 эв) величину [11]. Причина этого пока не ясна. Структура C в HgTe при галиевых измерениях не проявилась. Впервые замеченная нами структура при 4,70 эв в HgTe ставит под сомнение принятую

раньше интерпретацию структуры при 5,21 эв в ZnTe и 4,96 эв в CdTe, названную E'_0 (обозначения Кардоны [1]). В работе по электроотражению [5] в соединениях $A^{III}B^V$ группы обнаружено расщепление пика $E'_0 - E'_0 + \Delta'_0$ с величиной, всегда немного меньшей, чем Δ_1 (в соединениях группы $A^{II}B^{VI}$ это расщепление не обнаружено). Мы обозначили структуру при 4,22 эв и 4,7 эв в HgTe как E'_0 и $E'_0 + \Delta'_0$ соответственно с величиной $\Delta'_0 = 0,48$ (величина Δ_1 в HgTe равна 0,62 эв). Мы предполагаем, что структура при 4,7 эв HgTe, 5,21 эв в ZnTe и 4,96 эв в CdTe является не первым компонентом расщепления пика E'_0 , а вторым — $E'_0 + \Delta'_0$ и обосновываем этот дублет — $E'_0 - E'_0 + \Delta'_0$ переходами в точке Δ (Δ_{3v} , Δ_4 , — Δ_{3c}). следуя интерпретации, предложенной для соединений $A^{III}B^V$ [5]. Теоретические расчеты зонной структуры CdTe и ZnTe методами KKR [9] и OPW [10] не дали критических точек типа M_1 и M_2 в точке Δ , но метод псевдопотенциала [8] дал критическую точку типа M_1 в точке Δ при 5,3 эв, что несколько выше нашего экспериментального значения.

При понижении температуры от 295°K до 20°K в спектре отражения всех исследуемых материалов хорошо заметны две тенденции: резкое заострение пиков отражения и сдвиг всей структуры в сторону больших энергий. Фонон-электронное взаимодействие сдвигает энергии зон и приводит к уширению пиков за счет конечного времени жизни фононов. Обе эти величины зависят от температуры. Уширение за счет времени жизни уменьшается с температурой [3], чем и объясняется заострение пиков. Уменьшение фонон-электронного взаимодействия наряду с изменением параметра решетки при низких температурах сдвигает энергии зон в сторону больших энергий. Количественная и даже качественная теории этого явления в глубине собственного поглощения далеко не ясны и нуждаются в дальнейшей разработке. Анализ температурных сдвигов и попытка количественного объяснения причин этих сдвигов будут проведены в следующей работе.

Московский институт стали и сплавов,

МГУ физический факультет

Поступила 25.XII.1970

ЛИТЕРАТУРА

1. M. Cardona, Phys. Rev., 131, 98 (1963).
2. W. J. Scouler, G. B. Wright, Phys. Rev., 133A, 736 (1964).
3. Дж. Филипс, Оптические спектры твердых тел. М., 1968.
4. И. Н. Борисов, В. В. Михайлин, П. С. Киреев, С. И. Иванов, ФТП, 4, 1175 (1970).
5. M. Cardona, L. Shaklee, Phys. Rev., 154, 696 (1967).
6. M. Cardona, G. Harbeke, J. Appl. Phys., 34, 813 (1963).
7. R. Ludeke, W. Paul, Proc. Int. Conf. II—VI Comp. Providence, 413, 1967.
8. M. Cohen, Proc. Int. Conf. II—VI Comp. Providence, 462, 1967.
9. P. Echelt, Phys. St. Sol., 23, 307 (1967).

10. F. Herman, R. L. Kortum, C. D. Kuglin, R. A. Short, J. Phys. Japan, 21, 7 (1966).
 11. M. Cardona, J. Appl. Phys., 39, 2181 (1965).

A^{II} B^{VI} համակարգի ֆունդամենտալ անդրադարձումը 20° K ջերմաստիճանի շրջանում 1,75—5,64 էՎ էներգիայի միջակայքում

Ի. Ն. Բորիսով, Պ. Ս. Կիրեև, Վ. Վ. Միխայլև

Հոդվածում ուսումնասիրված է Zn Te, Cd Te և Hg Te մոնոքրիստալների անդրադարձումը 1,75—5,64 էՎ միջակայքում 20° K ջերմաստիճանի դեպքում:

GROUP A^{II} B^{VI} TELLURIDES FUNDAMENTAL REFLECTION IN 1.75—5.64 eV REGION AT 20°K

J. N. BORISOV, P. C. KIREEV, V. V. MIKCHAILIN

The reflection spectra of ZnTe, CdTe and HgTe are measured for photon energies between 1.75 and 5.64 eV at 300°K and 20°K. The new data in the reflection spectra of ZnTe at 5.54 eV, CdTe at 5.44 eV and HgTe at 5.37 and 5.54 eV are treated in terms of the interzonal transitions.